

Полухин В.А.^{1,2}, Курбанова Э.Д.¹, Белякова Р.М.¹,
Галашев А.Е.¹, Ризмант Л.К.¹

¹) Институт Металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург

²) ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет
им. первого Президента России Б.Н. Ельцина», г. Екатеринбург
kurbellya@mail.ru

ВЛИЯНИЕ НАГРЕВА НА ДИФфуЗИОННУЮ ПОДВИЖНОСТЬ В ИНТЕРФЕЙСАХ ГРАФЕН (G)/ПЕРЕХОДНЫЙ МЕТАЛЛ (TME: Cu, Pd, Ni)*

В работе проведено МД-моделирование для трех систем интерфейсов с разными энергиями связи: Ni/G, Pd/G, Cu/G (перечислены в порядке убывания прочности) с потенциалами взаимодействия, оцененными в рамках теории функционала плотности. Ранее авторами работы было показано, что именно сильным парным взаимодействием открытых d_z - и π_z -орбиталей при образовании гетероструктуры G/Ni объясняется высокая прочность связи G с Ni-подложкой не только по сравнению с G/Pd (такой же природой связи), но и с гетероструктурами G/Cu или G/Ir, где основные вклады представлены диполь-дисперсионными взаимодействиями (в результате транспорта заряда и выравнивающего сдвига уровня энергии Ферми в интерфейсе). Полученные нами ранее в результате МД-моделирования металлических кластеров на графеновой поверхности аналитические оценки термической эволюции межатомных взаимодействий также показывают, что потенциальная функция Морзе, параметризованная на основе квантово-механических расчетов в теории функционала плотности является более предпочтительной с физической точки зрения, чем формализм Ван-дер-Ваальса на основе потенциала Леннарда – Джонса.

Выполнено 4 серии расчетов: 1 – чистый G; 2 – G, имеющий на поверхности четыре кластера Pd₁₃ с ГЦК-структурой; 3 – G с четырьмя икосаэдрическими (Ih) кластерами Pd₁₃; 4 – G, имеющий на поверхности четыре кластера Pd₁₃ со случайной упаковкой атомов. Для сравнения проводилось моделирование термической эволюции кластерно-островковых интерфейсов с плоскостями металлов (111): Ni/G и Cu/G.

На рис. 1 приведено сравнение температурных изменений компонент коэффициентов диффузии D_{xy} и D_z , характеризующих подвижность атомов

* Работа поддержана Отделением химии и наук о материалах РАН (проект №12-Т-3-1022).

металлов во всей исследуемой температурной области (верхний ряд – D_{xy} , нижний ряд – D_z) для трех исследуемых систем. Наиболее высокие значения компонент D_{xy} атомов Cu для системы Cu/G достигаются при температуре 2000 К ($D_{xy} \sim 1,25 \cdot 10^{-4} \text{ см}^2/\text{с}$). Почти пятикратное увеличение D_{xy} свидетельствует о слабом взаимодействии атомов Cu с атомами С по сравнению с взаимодействием Pd-С и Ni-С (при 1200К для Ih-Pd $D_{xy} \sim 3,5 \cdot 10^{-6} \text{ см}^2/\text{с}$, а для Ni с ГЦК и Ih структурами $D_{xy} \sim 0,5 \cdot 10^{-6} \text{ см}^2/\text{с}$ и $D_{xy} \sim 0,25 \cdot 10^{-6} \text{ см}^2/\text{с}$, соответственно). Более высокие значения подвижности атомов Pd также отличаются более сильным термоактивированным выталкиванием атомов С при смещении атомов в кластере Pd_{13} в зону формируемого интерфейса Pd/G.

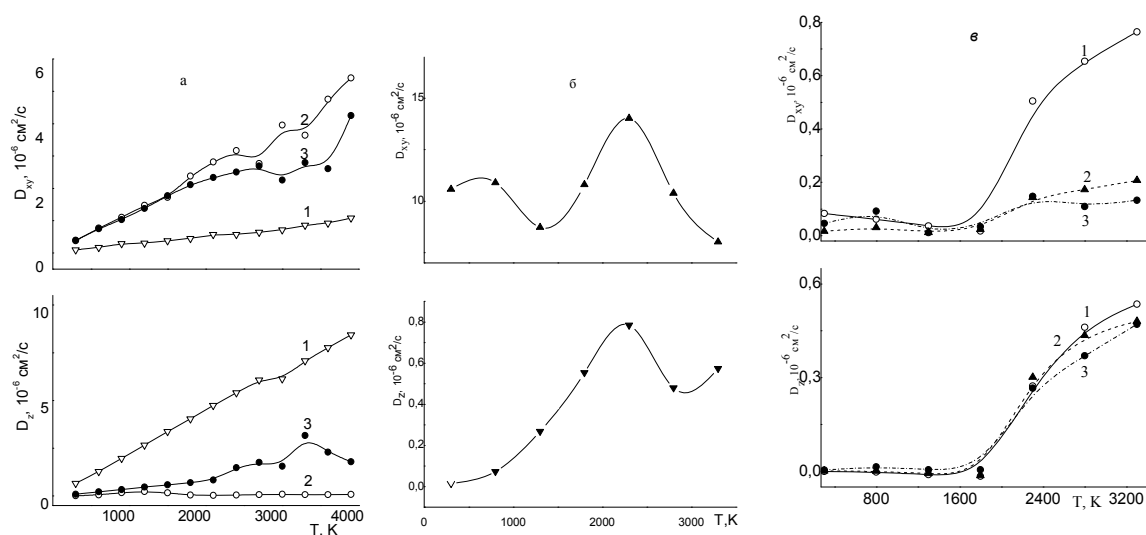


Рис. 1. Температурные изменения коэффициентов диффузии D_{xy} и D_z атомов металлов в интерфейсах: *а* – Pd (1 – G, взаимодействующий с четырьмя кластерами Pd_{13} , имеющими ГЦК структуру, 2 – лист G с четырьмя икосаэдрическими кластерами, 3 – G, имеющий на поверхности четыре кластера Pd_{13} со случайной упаковкой атомов); *б* – Cu; *в* – Ni (1 – пленка Ni на одной стороне листа G; 2 – сверху, 3 – внизу – пленки Ni на обеих сторонах листа G

Для всех рассматриваемых систем отмечена одна общая особенность динамики атомов металла. В прилегающих к G слоях металлических кластеров с увеличением температуры до 3000 К наблюдается рост значений подвижности (D_{xy}) и межатомных расстояний (примерно на 30–50 %) вдоль направлений структур G типа «зигзаг» (а не в поперечном направлении структур G типа «кресло»). Присутствие кластеров Ni на обеих сторонах G снижает почти в 4 раза миграцию атомов С и увеличивает межатомные

расстояния между ними за счет включения взаимодействия атомов металла через графеновый лист (при взаимном торможении их подвижности прежде всего в плоскости ХУ). Для кластеров Ni при одно- и двухстороннем их размещении на листах G более близкими оказываются зависимости коэффициентов самодиффузии вертикальных направлений D_z .